



TITLE:

近藤効果及びそれに関連したいくつかの問題 : 数値的繰り込み群の方法を中心として(強相関伝導系の物理 若手夏の学校,講義ノート)

AUTHOR(S):

清水, 幸弘

---

CITATION:

清水, 幸弘. 近藤効果及びそれに関連したいくつかの問題 : 数値的繰り込み群の方法を中心として(強相関伝導系の物理 若手夏の学校,講義ノート). 物性研究 1996, 65(4): 527-544

ISSUE DATE:

1996-01-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/95643>

RIGHT:

# 近藤効果及びそれに関連したいくつかの問題 — 数値的繰り込み群の方法を中心として —

東北大・工 清水 幸弘

## 1 はじめに

CeB<sub>6</sub>や CeCu<sub>6</sub>等の重い電子系化合物の電気抵抗の実験を見ると高温領域に降温とともに $-\log T$ で抵抗が上昇する近藤効果が現れる [1,2]。近藤効果は元来、金属中に稀薄に磁性不純物を取り入れたときに電気抵抗や比熱、帯磁率等の低温領域で観測され、理論的には、金属中にたった一つの磁性不純物を取り込んだ問題である。現在ではその全容がほぼ明らかになり、日本語による教科書も多数出版されている [3]。詳細な取り扱いについては原著論文やこれらの教科書を適宜参照していただき、本講演では最初に「近藤効果とはどのような現象であるか」の本質をできるだけ平易に解説する。そのなかで特にウィルソンによる数値的繰り込み群 (NRG) の方法が、近藤効果を理解するために果たした役割について述べ、NRGによる物理量の計算結果を紹介する。

重い電子系化合物の中には、高温領域で近藤効果が観測された後に、低温で RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) 相互作用による磁気秩序状態を示すものがある。近藤効果と RKKY 相互作用の競合する様子を最も簡単化して取り扱うのが二不純物近藤問題である。NRG法による研究から明らかになったことを紹介する。最後に、無限次元格子模型を用いた最近の研究の現状も紹介する。

## 2 近藤効果とは

### 2.1 一不純物アンダーソンモデル

近藤効果そのものについて記すより先に、金属中に取り込まれた磁性不純物が、局在スピンを保持するかどうかの問題を考察する。局在スピンを保持した系において近藤効果が観測されるのでまずはその舞台の説明から始めることにする。アンダーソンは以下のモデルを用いてこの問題を考察した [4]。

$$H = H_f + H_{cf} + H_c, \quad (1)$$

$$H_f = \varepsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow}, \quad (2)$$

$$H_{cf} = \sum_{k\sigma} v_k f_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + h.c., \quad (3)$$

$$H_c = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}. \quad (4)$$

磁性不純物が 3d 金属や 4f 金属の場合にはその遠心力ポテンシャルによって電子の軌道は不純物原子の回りに局在化していて、(2) 式の第 1 項がその局在軌道のエネルギーを表している。 $\varepsilon_f$ の値はフェルミエネルギーより十分小さいとする。また、第 2 項が局在電子間のクーロン相互作用項である。但し、ここでは局在電子の軌道縮退の効果は簡単化のため無視している。この局在軌道が (4) 式で表される母体金属の伝導電子バンドとトンネル効果

によって混ざりあう。この混成項は (3) 式によって記述される。これほど簡単化したモデルでも局在電子のクーロン相互作用項と混成項が同時に存在するために多体問題であり取り扱いが簡単でない。

まず、クーロン相互作用が無い場合を考えてみる。この場合は一体問題であり局在電子の状態密度は各スピンあたり

$$\rho_f(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(\varepsilon - \varepsilon_f)^2 + \Delta^2}, \quad (5)$$

$$\Delta = \pi \rho |v_k|^2, \quad (6)$$

となり、 $\varepsilon_f$  を中心として混成項による幅  $2\Delta$  をもつローレンツ型となる。但し、 $\rho$  は伝導電子の状態密度である。スピンあたりの局在電子数の期待値は、各スピンとも 1 程度となり局在スピンは発生しない。この状況は電子間相互作用があっても  $U \ll \Delta$  の場合は変わらないと考えられる。

今度は逆にクーロン相互作用が十分大きく、 $\Delta \ll |\varepsilon_f| \ll U$  の場合を考える。この極限を Coqblin-Schrieffer 極限あるいは s-d 極限と呼ぶ。 $\uparrow$  スピンあるいは  $\downarrow$  スピンどちらかの局在電子が存在するときにはその逆向きスピンの電子は大きなクーロン相互作用によって同時に存在する事ができなくなり、局在スピンが発生する。この状況のもとで一不純物アンダーソンモデルから摂動計算をすることによって有効ハミルトニアンとして s-d モデルを導出することができる [5]。  $H_c$  と  $H_f$  の項を非摂動項とし、 $H_{cf}$  項の 2 次摂動を考える。始状態としては、伝導電子バンドはフェルミ準位まで詰まった状態で上向きあるいは下向きスピンの局在電子が 1 つ存在する。終状態はフェルミ準位近くの伝導電子が励起され局在電子数は 1 つのままである。局在電子が 0 または 2 個ある状態はエネルギーが高く摂動の中間状態としてのみ考慮すればよい。有効ハミルトニアンは、

$$H = H_c - \frac{J}{2} \sum_{kk'\sigma\sigma'} (\sigma)_{\sigma'\sigma} \cdot S c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (7)$$

$$J = 2|v|^2 \left( \frac{1}{\varepsilon_f} - \frac{1}{\varepsilon_f + U} \right), \quad (8)$$

となる。ここでフェルミ準位をエネルギーの原点とし、中間状態で励起された伝導電子はフェルミ準位近くの状態なのでそのエネルギーを 0 とした。また、伝導電子のポテンシャル散乱の項はここでは重要でないので省略した。(7) 式第 2 項が伝導電子と局在スピン  $S$  との s-d 交換相互作用項で s-d モデルと呼ばれる。ここでは  $\varepsilon_f < 0, \varepsilon_f + U > 0$  を考えているので  $J < 0$ 、すなわち一不純物アンダーソンモデルから導出される s-d 相互作用は反強磁性的な相互作用であり、次節で説明するがこのことが近藤効果には本質的である。

上述したように一不純物アンダーソンモデルに基づくクーロン相互作用の大きさによって局在スピンの発生するような場合も発生しない場合も取り扱うことができる。その意味でこのモデルが金属中に磁性不純物を含む系の基本的モデルである。

## 2.2 抵抗極小の近藤理論

金などの貴金属に磁性不純物を稀薄に含む系の電気抵抗が低温で極小値を持つことは相当古くから知られていた。しかしその原因は長い間分からなかった。近藤は s-d モデル

を用いて伝導電子の散乱確率を摂動計算することによってその理由を説明した [6]。その過程を復習すると「量子力学的スピン自由度を持った不純物であること」と「伝導電子の散乱がそれ以外の伝導電子から影響を受ける多体問題である」という近藤効果における 2 つの本質が理解できる。以下に簡単に紹介する。

交換相互作用の 1 次の項からは温度に依存する抵抗は現れない。2 次の項のうち伝導電子の始状態と終状態のスピンが保存する過程は図 1 の 4 つである。これらの項からの散乱の  $T$  行列は、

$$\begin{aligned} & \langle k' \uparrow | T^{(2)} | k \uparrow \rangle \\ &= \left( \frac{J}{2} \right)^2 \left[ \sum_{k''} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{k''}} \langle M | S_z^2 | M \rangle \right. \\ & \quad + \sum_{k''} \frac{1 - f_{k''}}{\varepsilon - \varepsilon_{k''}} \langle M | S_- S_+ | M \rangle \\ & \quad \left. + \sum_{k''} \frac{f_{k''}}{\varepsilon - \varepsilon_{k''}} \langle M | S_+ S_- | M \rangle \right]. \quad (9) \end{aligned}$$

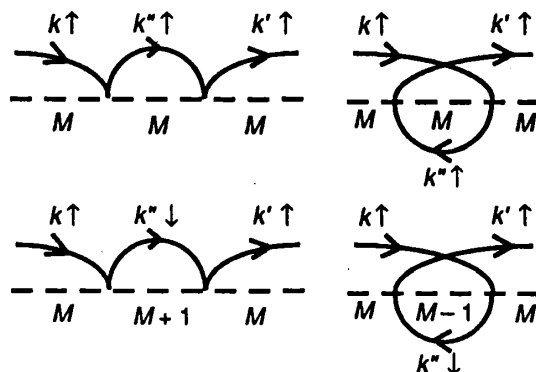


図 1: 局在電子による伝導電子の散乱の 2 次摂動過程。

ここで上式の第 2、3 項にフェルミ分布関数が含まれていることに注目する。ここでの局在スピンは量子スピンであり  $S_-$  と  $S_+$  が交換せず、フェルミ分布関数を含む項が打ち消しあうことがない。これは状態  $k$  の伝導電子の散乱にそれ以外の伝導電子の状態が関与することを意味している。

始状態と終状態のスピンが反転する 2 次の過程の  $T$  行列も同様に計算し、1 次の項（ボルン近似）とあわせて黄金則から電気抵抗を計算すると、

$$R = R_B \left( 1 + 2J\rho \ln \frac{k_B T}{D} \right), \quad (10)$$

となる。但し  $R_B$  はボルン近似の値で右辺第 1 項が温度によらない抵抗を与える。 $\rho, D$  はそれぞれ伝導電子バンドのフェルミ準位における状態密度、フェルミエネルギーの大きさである。第 2 項が 2 次からの寄与で  $J < 0$  の場合には低温で対数的に抵抗値が増大する。この項とフォノンによる抵抗の温度変化（降温とともに  $T^5$  で減少）とあわせて抵抗極小の現象が説明された。

(10) 式で温度が低下し  $2J\rho \ln(k_B T/D) > 1$  となると摂動の 2 次の項が 1 次の項より大きくなってしまふ。その温度  $k_B T_K = D \exp(1/2J\rho)$  を近藤温度と呼ぶ。このことは  $T_K$  より低温では 2 次摂動では不十分であること意味する。しかしながら更に高次の摂動過程のうち発散の大きい項を加えあわせても本質的な解決にはならず、電気抵抗が  $T = T_K$  で発散してしまふ。すなわち  $J$  を展開係数とする摂動計算を用いた高温からのアプローチは、 $T_K$  程度以下の温度に対して適用できないことになる。

### 3 ウィルソンの数値的繰り込み群の方法

#### 3.1 ハミルトニアンの変換と数値対角化

s-d モデルにおいて  $J$  を展開係数とする摂動計算や一不純物アンダーソンモデルで混成項を展開係数とする摂動計算は近藤温度程度より低温では困難となる。これに対して基底状態については一重項基底状態の理論 [7] があり、低温領域についてはフェルミ流体論に基づいて一不純物アンダーソンモデルの  $U$  を展開係数とする理論 [8] が有効である。両者の理論で困難な  $T_K$  程度の中間温度領域も含めて全温度領域の帯磁率の計算を初めて示したのがウィルソン [9] であり、この方法を数値的繰り込み群 (NRG) の方法とよぶ。この NRG による研究によって得られた重要なことは次の 2 つである。第 1 に、計算機を用いた数値的なものではあるが熱力学量を厳密に計算することが可能となったことである。第 2 には、低エネルギー状態が有効ハミルトニアンで記述される局所的フェルミ流体論に従うことを示し、それを用いてウィルソン比と呼ばれる比熱の  $\gamma$  係数と帯磁率の比を導出したことである。ウィルソンは s-d モデルに NRG の方法を適用し、その後一不純物アンダーソンモデルに適用したの Krishuna-murthy 等 [10] である。NRG の方法の本質的なことは両者で共通であり、ここでは一不純物アンダーソンモデルに適用する方法を簡単に紹介する。

NRG の方法は、ハミルトニアンを数値的に逐次対角化する方法である。そのためにウィルソンは 2 つの工夫をした。最初に伝導電子バンドを図 2 のように対数的に離散化し、各領域ごとにその平均エネルギーを持つ 1 つの状態を伝導電子の状態を代表化させる。 $\Lambda$  が離散化のためのパラメータで通常 2 ~ 3 程度の値を用いる。このような離散代表化によって近藤効果に重要な寄与をするフェルミ準位近くの伝導電子の状態を多く取り入れることができる。次に代表化した状態をユニタリー変換することによって図 3 にスキマティックに示したようなシェル軌道の形式で表す。 $s_{0\sigma}$  が中心にある局在電子と混成するシェル軌道であり、 $s_{0\sigma}$  と結合する軌道が  $s_{1\sigma}$  で、以降順に  $s_{2\sigma}, s_{3\sigma}, \dots$  とする。結局一不純物アンダーソンモデルの混成項と伝導電子項が

$$H_{cf} = \sum_{\sigma} v f_{\sigma}^{\dagger} s_{0\sigma} + h.c., \quad (11)$$

$$H_c = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \epsilon_{\ell} s_{\ell\sigma}^{\dagger} s_{\ell\sigma} + \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\sigma} t_{\ell} (s_{\ell+1\sigma}^{\dagger} s_{\ell\sigma} + h.c.), \quad (12)$$

となる。 $\ell$  の大きいところ、すなわち外側のシェル軌道においては  $\epsilon_{\ell} \propto \Lambda^{-\ell}$ ,  $t_{\ell} \propto \Lambda^{-\ell/2}$  となり、伝導電子のエネルギー、結合ともに小さくなる。この後説明するように、このことが実際に計算機を用いて逐次対角化を行う上で重要となる。(むしろ逐次対角化が可能なようにハミルトニアンを書き換えたわけである。)

$L$  番目のシェル軌道までを取り入れたハミルトニアン  $H_L$  は漸化式

$$H_L = \Lambda^{1/2} H_{L-1} + \frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \Lambda^{(L-1)/2} \sum_{\sigma} \left[ \epsilon_L s_{L\sigma}^{\dagger} s_{L\sigma} + t_{L-1} (s_{L+1\sigma}^{\dagger} s_{L\sigma} + h.c.) \right], \quad (13)$$

を満たす。 $H_L$  の行列要素は  $H_{L-1}$  の固有値と  $s_{L\sigma}$  等の行列要素を用いて表すことができ、これを数値的に対角化する事によって  $H_L$  の固有値、固有状態を求めることができる。この手続きを繰り返すことによって順次  $L$  の大きい系の固有値と固有状態を求めていくわけだが、 $L$  の増加につれ行列要素が増大し、計算機のメモリ容量を越えてしまい数値対角化を繰り返すことができなくなる。たとえばバンド幅 10eV の系で  $T_K = 10K$  程度のエネルギー

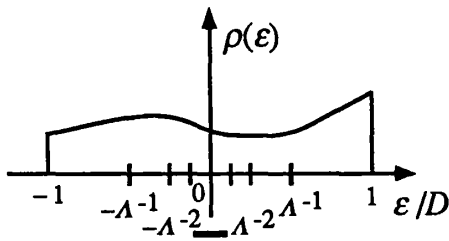


図 2: 伝導電子バンドの対数離散化.

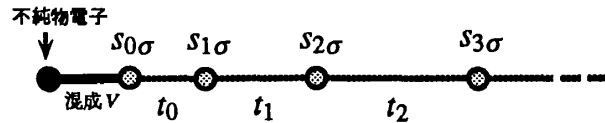


図 3: 逐次対角化可能な形式に変換されたアンダーソンモデルのスキマチックな図.

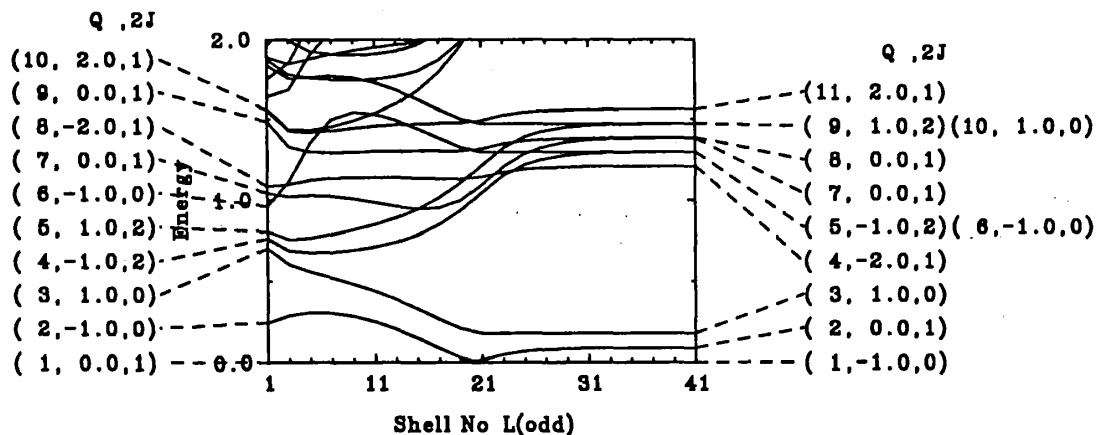


図 4: エネルギー固有値の流れ図.

スケールまで  $\Lambda = 2$  の離散化パラメータで取り扱おうとすると行列要素数は  $(2 \times 10^{16})^2$  にもなる。現実には繰り返し数値対角化が可能となるようにNRG法では  $H_L$  の行列要素を求めるときに  $H_{L-1}$  の固有状態のうちエネルギーの高い状態を捨て去る。外側のシェル軌道のエネルギーが外側になるに従い  $\Lambda$  のべきで小さくなるために、このような状態を捨て去る手続きを行っても各NRGステップで十分な状態数を残すことができれば物理量を精度よく計算することが可能となる。それは物理量の計算において注目しているエネルギースケール（熱力学量なら温度、励起スペクトルにおいては励起エネルギー）より十分小さい固有エネルギーの分裂は重要な寄与をしないからである。NRG法では外側のシェル軌道を付け加えるに従い低エネルギー領域の物理量を計算するようになっている。そして  $L$  の十分大きいところまでステップを進めることによって基底状態の物理量を求めることができる。

NRG法で物理量を計算した結果を紹介する前に、各NRGステップで求められる固有値と固有状態を解析することによって得られる情報について記す。図4に  $L$  が奇数の  $H_L$  の固有値のうち低エネルギーのものをそれぞれの  $L$  の最低エネルギー状態からはかって示した。但し、エネルギー固有値に  $\Lambda^{(L-1)/2}$  の因子をかけてあり、 $L$  の大きいところでは拡大

されている。図の左右に示した数値の組は全電子数のハーフフィールドからのずれ  $Q$  と全角運動量  $J$  でありこの値が状態を整理するインデックスとなる。このように  $L$  の奇数のみ、あるいは偶数のみを表示すると同じインデックスを持つ状態は滑らかに変化する。図の左端近くの領域は最低エネルギーの状態が磁性状態であり混成項を摂動的に扱える“弱結合”の描像で理解する事ができる。右端近くの領域ではエネルギー固有値の変化がほとんどなくなり固有値にスケール則が成り立っていることが分かる。すなわち  $L = 31$  程度より大きいところの固有状態から基底状態と低エネルギー励起状態について考察することが可能となる。その結果、固有状態が一粒状態に電子を詰めた組み合わせ（一粒モデル）で理解できる。最低エネルギー状態はフェルミ準位まで電子を詰めた一重項状態であり、第一励起状態は一電子励起状態、第二励起状態はその準位での二電子励起状態である。この二電子励起状態は  $L$  の大きい右端では一電子励起状態の2倍のエネルギーを持つが、図の  $L = 25$  程度の領域ではちょうど2倍とならない。このずれは電子間相互作用を摂動で扱うことで説明できる。このことは低エネルギー状態が局所的フェルミ流体理論で記述できることを示している。以上の解析から  $L$  の大きい領域の低エネルギー固有状態を記述する有効ハミルトニアンを見つけだすことができる。有効ハミルトニアンは一不純物アンダーソンハミルトニアンと同一の形式を持ち、そのパラメータが有効パラメータとなる。その有効パラメータを用いて比熱の  $\gamma$  係数と帯磁率の絶対零度極限值、及びその比であるウィルソン比を有効電子間相互作用の1次摂動で求めることができる。

NRG法は、近似計算でなく基底状態の性質を調べることができる信頼できる方法である。上記の通り単純な一不純物アンダーソンモデルでは基底状態は局所的フェルミ流体理論に従うことが分かっているが、一不純物アンダーソンモデルの伝導電子間に相互作用を考慮したモデルや局在電子数が2個の状態が安定な場合において基底状態がフェルミ流体とはならない場合があることが最近のNRGによる研究によって明らかになってきた [11,12]。フェルミ流体でない状態がどんな状態であるかの研究は現在継続中である。

### 3.2 熱力学量と励起スペクトルの計算結果

一不純物アンダーソンモデルの熱力学量と励起スペクトルを計算した結果について紹介する。帯磁率と比熱の温度変化を厳密に計算する方法としてはNRG法 [10] に加えてベータ仮説による厳密解の方法 [13] と量子モンテカルロ法によるもの [14] がある。一方、励起スペクトルの計算はこれまでに近似理論が用いられることが多かった。特に局在電子の縮退度の逆数を展開係数とする  $1/N$  展開の近似 [15] がよく用いられたが、絶対零度における励起スペクトルの計算には困難が生じた。低温での励起スペクトルを広いエネルギー領域にわたって信頼できる精度で計算可能な方法はNRG法である [16]。絶対零度における計算ではFriedel 総和則やKorringa-Shibaの関係式を数%以下の精度で満たすことができる。量子モンテカルロ法に最大エントロピーの方法を組み合わせる励起スペクトルを計算する方法も発展してきている [17]。ここではNRG法によって得られた結果の一例を示し計算結果から得られた特徴的なことについて説明する。

図5が熱力学量の計算結果である。2重縮退で  $U$  の十分大きい場合で  $\circ, \diamond, \triangle, \square$  の順に  $f$  準位  $\epsilon_f$  を深くした結果であり、近藤温度  $T_K$  とウィルソン比  $R$  は  $\circ$  から順に  $(T_K/D, R) = (1.61 \times 10^{-1}, 1.58), (4.06 \times 10^{-2}, 1.85), (1.77 \times 10^{-3}, 2.00), (8.25 \times 10^{-4}, 2.00)$  である。ここ

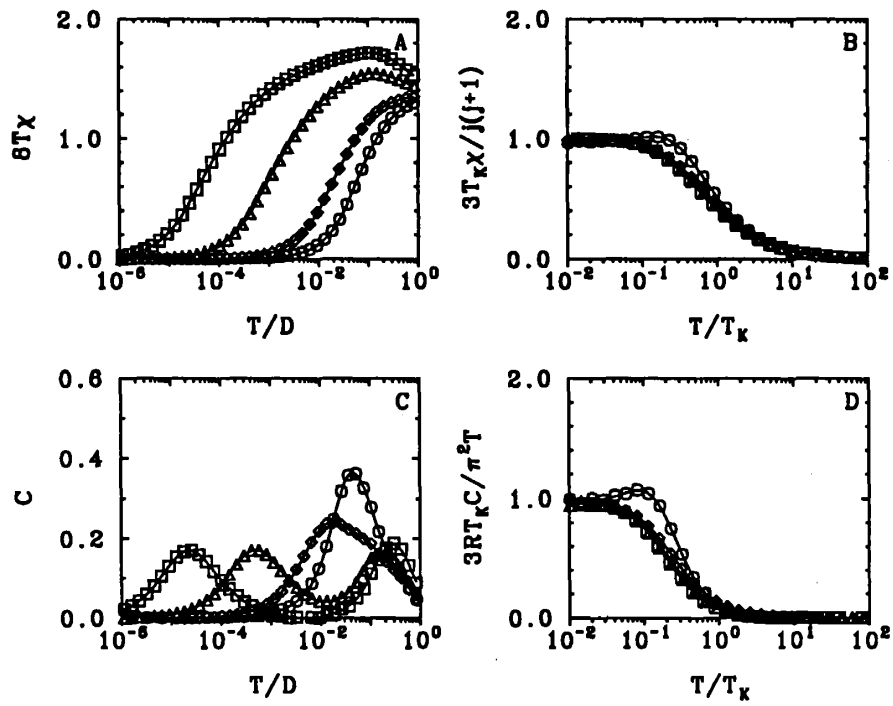


図 5: 一不純物アンダーソンモデルの熱力学量.

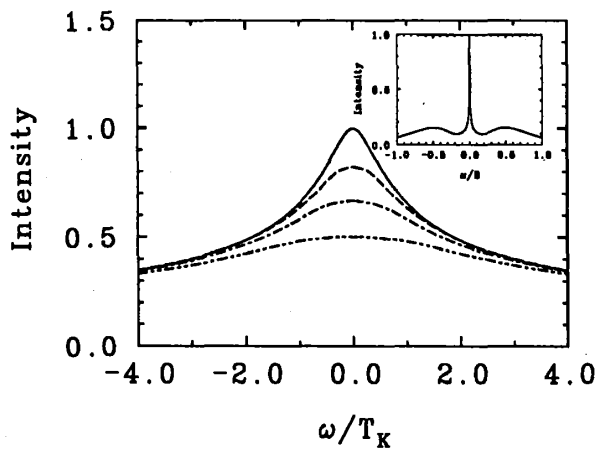


図 6: 一不純物アンダーソンモデルの一粒子励起スペクトルの温度変化 [16].

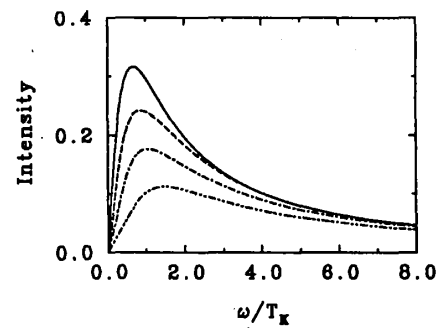


図 7: 一不純物アンダーソンモデルの磁気励起スペクトルの温度変化 [16].



で  $D$  は伝導電子バンドの半幅である。o のように極端な価数揺動レジュームの場合を除いて帯磁率  $\chi$  と比熱  $C$  が近藤温度とウィルソン比でスケールされることが分かる (図 B, C)。

図 6 が 2 重縮退のモデルの一粒子励起スペクトルの近藤ピークの部分の温度変化である。 $\omega < 0$  の領域が PES の実験に対応し  $\omega > 0$  の領域が BIS の実験に対応する。温度はそれぞれ、 $T/T_K = 0$  (実線), 0.35 (破線), 0.7 (1 点鎖線), 1.4 (2 点鎖線) である。 $T_K$  程度の温度で近藤ピークの強度が絶対零度の時の半分程度になる。挿入図は絶対零度の時の一粒子励起スペクトルの全体図である。図 7 は磁気励起スペクトル  $\chi''(\omega, T)$  の温度変化であり、計算に用いた温度は図 6 と同じである。絶対零度で  $0.6T_K$  程度にあるピークが、温度の増加とともに強度を減らしながら高エネルギー側へ移動する。一粒子励起スペクトルの温度変化の計算結果を用いると電気伝導度や熱起電力を計算することができる [18, 19]。その結果や軌道縮退のある系については講演で紹介する。

#### 4 近藤効果に関連した諸問題

##### 4.1 近藤効果と結晶場励起

Ce 化合物中の  $\text{Ce}^{3+}$  イオンのスピン軌道相互作用による基底状態は  $J = 5/2$  の 6 重縮退の状態であり、結晶場によってこの状態が分裂する。たとえば立方晶中では  $\Gamma_7$  (2 重縮退) と  $\Gamma_8$  (4 重縮退) に分裂し、六方晶中では 3 つの 2 重項に分裂する。Ce 化合物あるいは Yb 化合物において結晶場分裂がある場合の近藤温度の表式を半澤等 [20] はスケーリングの方法を用いて

$$T_K = \left[ \prod_{i=1}^m \left( \frac{D}{\Delta_i} \right)^{N_i/N_0} \right] D \exp \left( \frac{2}{\rho J N_0} \right), \quad (14)$$

と導出した。ここで  $N_0$  は結晶場の基底状態の縮退度で  $N_i, \Delta_i$  はそれぞれ結晶場の第  $i$  励起状態の縮退度と基底状態からかったエネルギーである。たとえば結晶場の基底状態が 2 重縮退で第一励起状態が 4 重縮退の場合を考えると、この系の近藤温度は基底状態のみを考慮した場合の  $(D/\Delta)^2$  倍となり、結晶場の励起状態が近藤効果にかなり寄与することが分かる。

結晶場分裂を考慮した Coqblin-Schrieffer 極限の一不純物アンダーソンモデルの熱力学量の計算はバート仮説による厳密解 [13, 21] と NRG による研究 [22] がある。また励起スペクトルについては  $1/N$  展開等の近似計算と NRG によるもの [22] がある。ここでは NRG 法で取り扱った結果を示す [22]。結晶場の基底状態と第一励起状態がともに 2 重縮退の系を考える。これは六方晶の結晶場中で分裂した 3 つの 2 重項のうち第二励起状態はエネルギーが非常に高く、基底状態と第一励起状態のみを考慮したモデルに対応し、 $\text{CePd}_2\text{Al}_3$  はその例である。図 8 が比熱の計算結果である。結晶場の基底状態と励起状態のエネルギーの重心を一定にしたまま励起エネルギー  $\Delta$  を増加させ、 $\Delta/T_K^0 = 0$  (a), 1.1(b), 2.2(c), 3.3(d), 6.7(e) の場合が図示してある。ここで  $T_K^0$  は結晶場励起が無い場合、すなわち図 a の場合の近藤温度である。図 a の  $T/D \sim 10^{-3}$  程度にある 4 重縮退の状態に起因する近藤ピークが  $\Delta$  の増加とともに分裂する。 $\Delta/T_K^0 \sim 2$  となると肩構造を持つようになり、それ以上の結晶場励起エネルギーでははっきり 2 つのピークに分裂する。低エネルギー側のピークが結晶場の基底状態に起因する近藤ピークであり、高エネルギー側のそれは結晶場励起のショットキータイプのピークである。図 9 の実線が絶対零度における磁気励起スペクトル

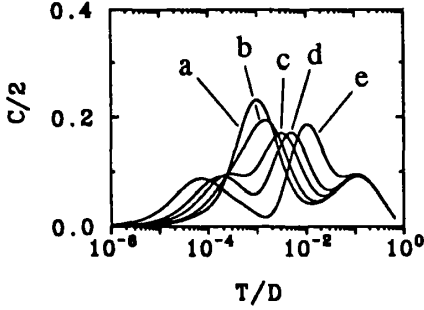


図 8: 結晶場励起のある系の比熱 [22].

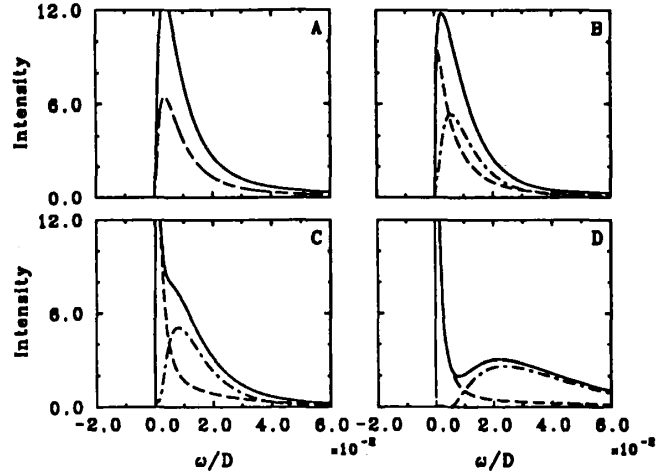


図 9: 結晶場励起のある系の磁気励起スペクトル [22].

$\chi''(\omega, T=0)$  である。破線、一点鎖線はそれぞれ  $\chi''$  の対角成分と結晶場状態間の非対角成分である。励起エネルギー  $\Delta$  の値は  $\Delta/T_K^0 = 0$  (A), 1.1(B), 2.2(C), 6.7(D) である。比熱の計算結果と同様に  $\Delta/T_K^0 \sim 2$  となると肩構造が現れ、それより結晶場励起エネルギーが大きい場合は近藤ピークと結晶場ピークに分裂する。また、一粒子励起スペクトルの計算結果も同様に  $\Delta/T_K^0 \sim 2$  で肩構造となる。

#### 4.2 近藤効果とサイト間相互作用（二不純物問題）

現実の系で不純物濃度が大きくなった場合、あるいはヘビーフェルミオン物質のような格子系においては、一不純物モデルで理解できる近藤効果に加えて局在電子のサイト間相互作用も重要となる。この問題を最も単純化して取り扱うモデルが二不純物アンダーソンモデルである。

$$H = H_f + H_{cf} + H_c, \quad (15)$$

$$H_f = \varepsilon_f \sum_{i=1}^2 \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} + U \sum_i f_{i\uparrow}^{\dagger} f_{i\uparrow} f_{i\downarrow}^{\dagger} f_{i\downarrow} - t \sum_{\sigma} \left( f_{1\sigma}^{\dagger} f_{2\sigma} + h.c. \right) + J \sigma_1 \sigma_2, \quad (16)$$

$$H_{cf} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i\mathbf{k}\sigma} v_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i) f_{i\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + h.c., \quad (17)$$

$$H_c = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (18)$$

サイト間相互作用としてはサイト間のトランスファー  $t$  による直接交換相互作用と伝導電子との混成を媒介とする RKKY 相互作用がある。4f 電子系化合物の場合は電子が比較的局在しているので後者の効果が重要と考えられている。また、ここでは局在電子の交換相互作用の自由度を拡げるために更に  $J$  の項を“手で”つけ加えておく。

これらの全体としての交換相互作用が強磁性的である場合には、局在スピン  $S=1$  と 2 つのスピン  $1/2$  の伝導電子が結合する 2 チャンネル近藤問題となり、基底状態は近藤効

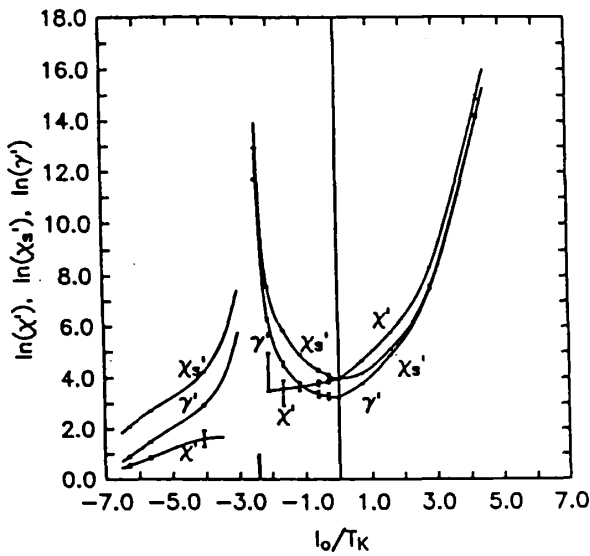


図 10: ユニフォーム帯磁率 $\chi'$ 、反強磁性帯磁率 $\chi_s'$ 、 $\gamma$ 係数の RKKY 相互作用依存性 [24].  $I_0 < 0$  が反強磁性的な相互作用で、 $I_0/T_K \sim -2.2$  がクリティカルな点.

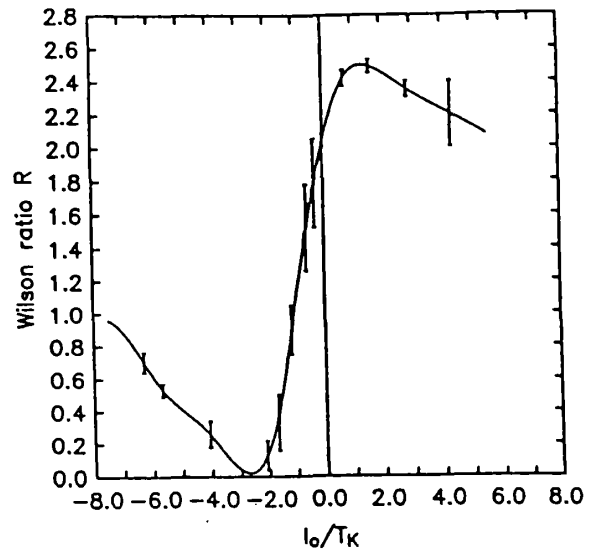


図 11: ウィルソン比の RKKY 相互作用依存性 [24].

果による一重項状態となる。逆に交換相互作用が著しく反強磁性的である場合には2つの局在スピが一重項状態を形成し近藤効果は起こらない。ナイーブには基底状態が分からないのは両者の中間的な場合、すなわち局在スピ間に弱い反強磁性相互作用がある場合である。Jones 等は二不純物近藤モデルに NRG の方法を用いて基底状態の移り変わりを調べた [24]。(一不純物アンダーソンモデルから s-d モデルが有効モデルとして導出されるのと同様に、二不純物アンダーソンモデルから導出される有効モデルが二不純物近藤モデルである。) サイト表示されたモデルをパリティを用いて表示し直すと NRG の方法が適用できる。数値計算の結果、 $I_0/T_K \sim -2.2$  が基底状態が移り変わるクリティカルな点であり、その一点で比熱の $\gamma$ 係数と反強磁性帯磁率が発散する事が分かった(図 10)。ここで  $T_K$  は一不純物モデルでの近藤温度である。クリティカルな点でユニフォームな帯磁率は発散しない。従ってクリティカルな点でウィルソン比は 0 となる(図 11)。クリティカルな一点を除いて低エネルギー状態はフェルミ流体的な有効ハミルトニアンで記述する事ができる。

その後の我々の NRG 法による研究によって Jones 等の指摘した $\gamma$ 係数等の発散はモデルの単純化に依存していたことが分かった [25]。サイト間のトランスファー $t$ 、あるいは伝導電子との混成項  $H_{cf}$  が交換相互作用の起源となるので、一般にはモデルにパリティ分裂が存在する。Jones 等は単純化のためにパリティ分裂を無視したモデルを用いていた。パリティ分裂を考慮した数値計算を行うと $\gamma$ 係数等の発散が抑制された。現実の系においてはパリティ分裂が一般に存在するわけで $\gamma$ 係数等は発散しない。しかしながらパリティ分裂が小さい場合には $\gamma$ 係数等が増加する。

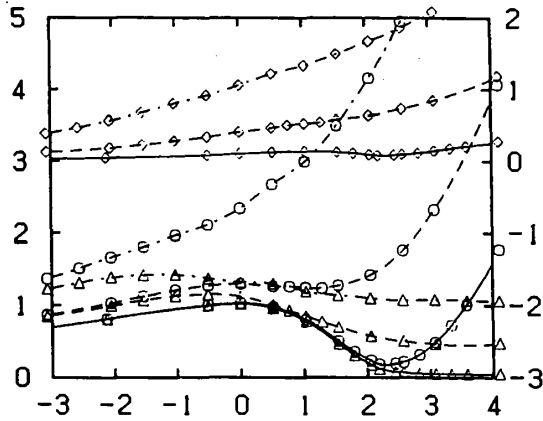


図 12:  $t$  によってパリティ分裂のあるモデルの有効ハミルトニアンのパラメータと  $\gamma$  係数の交換相互作用依存性 [25].

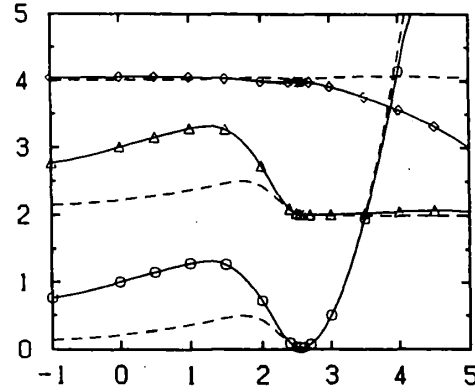


図 13: 混成の大きさがパリティ依存するモデルの有効ハミルトニアンのパラメータと  $\gamma$  係数の交換相互作用依存性 [25].

はじめに小さな  $t \sim T_K$  によってパリティ分裂が存在する場合の数値計算の結果を示す。 $t \neq 0$  の場合の低エネルギー状態は、フェルミ流体的な有効ハミルトニアンで記述することができる。比熱の  $\gamma$  係数はその有効パラメータを用いて

$$\frac{\gamma}{\gamma_0} = \frac{\Delta_0}{4} \sum_{p\sigma} \frac{\Delta_p}{\Delta_p^2 + \delta_p^2}, \quad (19)$$

と表される。ここで  $\Delta_p, \delta_p$  がそれぞれ有効混成幅、有効準位であり、 $p$  はパリティを表す。また  $\gamma_0, \Delta_0$  は同じパラメータを用いた一不純物アンダーソンモデルでの値である。図 12 にその有効パラメータと  $\gamma$  係数の交換相互作用依存性を示した。横軸が  $j \equiv 4J/T_K$  ( $T_K$  は同じパラメータを用いた一不純物アンダーソンモデルの近藤温度) であり、 $j > 0$  の領域が反強磁性である。仮に  $t = 0$  とすれば  $j = j_c \sim 2.2$  が Jones 等の指摘したクリティカルな点である。実線、破線、一点鎖線の順に  $t/T_K = 1.3, 3.9, 6.5$  の 3 種の  $t$  について示してある。ここでの対称性から  $\Delta = \Delta_e = \Delta_o$ ,  $\delta = -\delta_e = \delta_o$  となる。丸印が  $\gamma_0/\gamma$  を表し、三角印が  $\Delta/\Delta_0$  を表す。またダイヤモンドが  $\delta/\Delta_0$  を表し、メモリは右側に示してある。 $t \sim T_K$  の場合 (実線) には、 $j$  を 0 から  $j_c$  に向かって増加させると  $\delta$  はほとんど変化しないが、 $\Delta$  が減少し  $\gamma$  が増大することが分かる。この領域における  $\gamma$  係数は低エネルギースケール  $\omega_\ell/T_K = [(j - j_c)/1.5]^2 + (t/23T_K)^2$  を用いて、 $\gamma \propto \omega_\ell^{-1}$  とかける。また、反強磁性帯磁率は  $\chi'_a \propto \ln \omega_\ell^{-1}$  となる。さらに  $j$  を増加させると  $\Delta$  は小さな値を保つが  $\delta$  が増加し  $\gamma$  は減少する。この  $\Delta$  と  $\delta$  の  $j$  に対する変化は NRG 法で計算した一粒子励起スペクトルのフェルミ準位近くの振る舞いの  $j$  依存性と無矛盾となっている。 $t > 4T_K$  となると  $\gamma$  係数の増加する領域は見られなくなる。

混成項のエネルギー依存性やパリティ依存性によってパリティ分裂が存在する場合も  $\gamma$  係数等の発散が抑制される。図 13 に混成項がエネルギー依存性はないがその大きさにパリティ依存性があるモデルの有効パラメータと  $\gamma$  係数を示した。実線が偶パリティに対する結果で点線が奇パリティに対する結果である。丸、三角、ダイヤモンドの順に

$\gamma_0/\gamma_p$ ,  $\Delta_p/\Delta_0 = 2$ ,  $\delta/\Delta_0 = 4$  を表す。 $\gamma$ が増加する付近での $\Delta, \delta$ の振る舞いは、トランスファー $t$ によってパリティ分裂が生じた場合と同様である。また、この場合の低エネルギースケールは偶奇の2つのパリティの平均値を用いた一不純物モデルの近藤温度と同程度になる。

#### 4.3 無限次元格子モデルを用いたアプローチ

低温で遍歴したf電子系を取り扱うためには電子相関の強い電子が不純物としてではなく周期的な格子として存在するモデルを取り扱う必要がある。その基本的モデルが周期アンダーソンモデルである。一次元の模型については数値的な研究がなされているが、二次元、三次元の場合には数値的解法も非常に困難となる。ところが無限次元の極限を考えると、数値計算の助けを借りてこのモデルやハバードモデルを厳密に扱うことができる [26, 27]。無限次元の極限は次元の逆数を展開係数とした場合の出発点となるので最近注目され多数の研究がある [28]。この方法は最初にハバードモデルに適用され、金属-非金属転移の研究が多くなされ、現在も続いて研究されている [28]。無限次元の方法の本質的な部分は、ハバートモデルに適用する場合と周期アンダーソンモデルに適用する場合とで同様であり、ここでは重い電子系の問題を取り扱いたいので、周期アンダーソンモデルに適用する方法を紹介する。

周期アンダーソンモデルを実空間のサイト表示で表すと、

$$\begin{aligned} H = & - \sum_{i \neq j\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \\ & + \sum_{i\sigma} \epsilon_f f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \sum_i U n_{fi\uparrow} n_{fi\downarrow} \\ & + \sum_{i\sigma} V c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + h.c., \end{aligned} \quad (20)$$

となり、 $f$ が相関の強い局在的な電子を表し、 $c$ がもつぱら遍歴的な性質を持つ伝導電子を表す。以下では簡単な例として、格子定数 $a$ の $d$ 次元 simple hyper cubic (2次元正方格子、3次元単純立方格子、... と仮想的に $d$ 次元に拡張する。)を考える。伝導電子のホッピングを最近接格子点間のみとし $t_{ij} = t/(2\sqrt{d})$ とするとエネルギー分散、スピンあたりの状態密度の $d \rightarrow \infty$ での値はそれぞれ、

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_c - \frac{t}{\sqrt{d}} \sum_{l=1}^d \cos k_l a, \quad (21)$$

$$\rho_c^{(0)}(\epsilon) = \frac{1}{\sqrt{\pi}t} \exp -(\epsilon/t)^2, \quad (22)$$

となる。ここで $t_{ij}$ を $1/\sqrt{d}$ でスケールしたことによって状態密度のガウシヤンの幅が有限となり、物理的な意味を持つモデルとなっていることに注意する。

無限次元の方法では、サイト表示したf電子の一粒子グリーン関数 $G_{ij\sigma}^f(z)$ の $U$ による自己エネルギーのうちサイト対角項のみを残す局所的な問題を取り扱えばよい [26, 27]。すなわち $k$ 表示では自己エネルギーが $k$ 依存しなくなる。このことを最も簡単に観るために

2 次の自己エネルギー  $\Sigma_{i \neq j\sigma}^{(2)}$  を調べてみる。自由粒子 ( $U$  の 0 次) のグリーン関数のサイト非対角項は、 $t_{ij}$  が  $1/\sqrt{d}$  でスケールされているので次元  $d$  で整理すると  $G_{i \neq j\sigma}^{f(0)}(z) = O(1/\sqrt{d})$  となる。これに対してサイト対角項は  $O(1)$  の量である。 $\Sigma_{i \neq j\sigma}^{(2)}$  は 3 本の  $G_{i \neq j\sigma}^{f(0)}(z)$  で表され、最近接点の数は  $O(d)$  なので、 $\sum_j \Sigma_{i \neq j\sigma}^{(2)} = O((1/\sqrt{d})^3 \times d) = O(1/\sqrt{d})$  となる。これに対してサイト対角項の自己エネルギーは  $O(1)$  の量なので無限次元の極限では非対角項の寄与を落とすことができる。更に高次の自己エネルギーについても同様に考察できると考えられている。

自己エネルギーとして同一サイトでの効果のみを取り入れれば良いので次の有効一サイトモデルを考える。

$$H = \tilde{H} + U n_{f0\uparrow} n_{f0\downarrow}. \quad (23)$$

周期アンダーソンモデルのうち、あるサイト (0 サイトと呼ぶ) でのクーロン相互作用のみを取り出しそれ以外の項を  $\tilde{H}$  とする。今、仮に  $\tilde{H}$  の 0 サイトでの  $f$  電子のグリーン関数  $\tilde{G}_\sigma^f(z)$  が厳密に求められたとする。 $\tilde{G}_\sigma^f(z)$  には 0 サイト以外の相互作用が全て含まれている。 $H$  の 0 サイトでのグリーン関数  $G_\sigma^f(z)$  は、 $\tilde{G}_\sigma^f(z)$  と 0 サイトでの  $U$  のよる自己エネルギー  $\Sigma_\sigma^{\text{imp}}$  を用いて

$$G_\sigma^f(z) = \frac{1}{\tilde{G}_\sigma^f(z)^{-1} - \Sigma_\sigma^{\text{imp}}(z)}, \quad (24)$$

と表される。ここで  $\Sigma_\sigma^{\text{imp}}$  はサイトによらないことに注意しておく。一方、グリーン関数を  $k$  表示で表すと、

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^f(z) = \frac{1}{z - \varepsilon_f - \Sigma_\sigma(z) - |V|^2 / (z - \varepsilon_{\mathbf{k}})}, \quad (25)$$

となる。上式からサイト表示のグリーン関数を求めると、

$$\begin{aligned} G_\sigma^f(z) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}^f(z) \\ &= G_{0\sigma}^f(z), \end{aligned} \quad (26)$$

となる。ここで最後の等式は先に記したように  $\Sigma_\sigma(z)$  が  $\mathbf{k}$  によらないことを用いた結果である点に注意する。 $G_{0\sigma}^f(z)$  は、0 サイト以外のサイトで相互作用のない ( $U = 0$ )、サイト表示でのグリーン関数であり、

$$G_{0\sigma}^f(z) = \int d\varepsilon \frac{\rho_c^{(0)}(\varepsilon)}{z - \varepsilon_f - \Sigma_\sigma(z) - |V|^2 / (z - \varepsilon)}. \quad (27)$$

$\rho_c^{(0)}$  は伝導電子の状態密度で、この量だけが結晶格子の情報をグリーン関数に反映している。(24) 式と (25) 式の自己エネルギーは互いに等しいことが示されていて [29–31]、(24) 式と (26) 式は各  $z$  において  $G_\sigma^f, \tilde{G}_\sigma^f, \Sigma_\sigma$  を決める連立方程式となっている。ここで (24) 式と (26) 式を自己無撞着に満たす  $\tilde{G}_\sigma^f$  を見つけだすことができれば、この問題が  $\tilde{G}_\sigma^f$  で記述される有効媒質中の一サイト問題となり、グリーン関数を計算する事ができるわけである。

$\tilde{G}_o^f$ を計算する一般的なモデルとして  $U$  の無い一不純物アンダーソンモデルを用いることができ [29–31]、

$$\begin{aligned}\tilde{G}_o^f(z)^{-1} &= z - \tilde{\epsilon}_f - \frac{1}{N} \sum_k \frac{|\tilde{V}_k|^2}{z - \tilde{\epsilon}_k} \\ &= z - \tilde{\epsilon}_f - \frac{1}{\pi} \int d\epsilon \frac{\tilde{\Delta}(\epsilon)}{z - \epsilon}.\end{aligned}\quad (28)$$

ここで  $\tilde{\Delta}(\epsilon) = \pi \tilde{\rho}(\epsilon) |\tilde{V}(\epsilon)|^2$  は有効媒質の混成幅である。3章で示したような単純な一不純物問題においては混成幅のエネルギー依存性を落としたモデルが多く用いられたが、ここでの  $\tilde{\Delta}(\epsilon)$  は自己無撞着に決定される量であり一般にはエネルギー依存性を持っている。グリーン関数を自己無撞着に決定する手順は次の通りである。

- (i)  $\tilde{G}_o^f$  を仮定、すなわち  $\tilde{\epsilon}_f$  と  $\tilde{\Delta}(\epsilon)$  を仮定する。
- (ii) それに  $U$  を入れた一不純物アンダーソンモデルを解いて  $G_o^f$  を計算する。
- (iii) (24) 式より  $\Sigma_o$  を計算し、それを (26), (27) 式に代入し、 $G_o^f$  を求める。
- (iv) (iii) で求めた  $G_o^f$  を (ii) のそれと比較し、全ての  $z$  で等しくなければ  $\tilde{G}_o^f(z)^{-1} = G_{o\sigma}^f(z)^{-1} + \Sigma_o(z)$  として (ii) から繰り返す。

(ii) の一不純物アンダーソンモデルを解くときに様々な一不純物問題の解法が組み合わされ、クーロン相互作用項による摂動計算、量子モンテカルロ法、NRGの方法が用いられている。

ここでは電子–ホール対称な無限次元周期アンダーソンモデルに量子モンテカルロ法を組み合わせた Jarrell による計算結果について紹介する [32]。図 14 が全状態密度 (a) と  $f$  電子の状態密度 (b) の温度変化である。計算に用いたパラメータは  $t=1$  をエネルギーの単位として  $V=0.5, U=2.0$  である。低温では、フェルミ準位にギャップが開くようになり、基底状態は絶縁体である。但し、ちょうどフェルミ準位のところにギャップができる振る舞いは、電子–ホール対称なモデルを用いていることに依存していることに注意する必要がある。図 (b) から分かるように温度が  $\beta=10$  と  $15$  の間で、 $f$  電子の状態密度の低エネルギー部分の振る舞いに変化している。高温側の振る舞いは、一不純物問題で見られた近藤ピークを持つ描像である。低温側ではバンド理論で見られるような混成ギャップを持つ描像となる。但し、

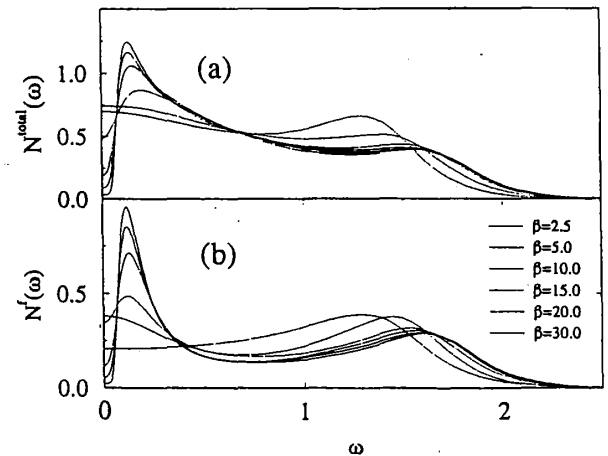


図 14: 電子–ホール対称無限次元周期アンダーソンモデルの全状態密度 (a) と  $f$  電子の状態密度 (b) の温度変化 [32]。パラメータは  $V=0.5, U=2.0$  で  $T_0=0.23$  となる。

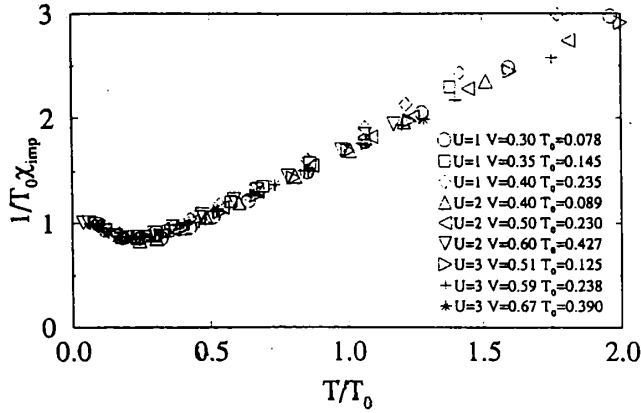


図 15: 電子-ホール対称無限次元周期アンダーソンモデルの帯磁率  $\chi_{imp}(T)$  [32].  $\chi_{imp}(T)$  の意味は本文参照.

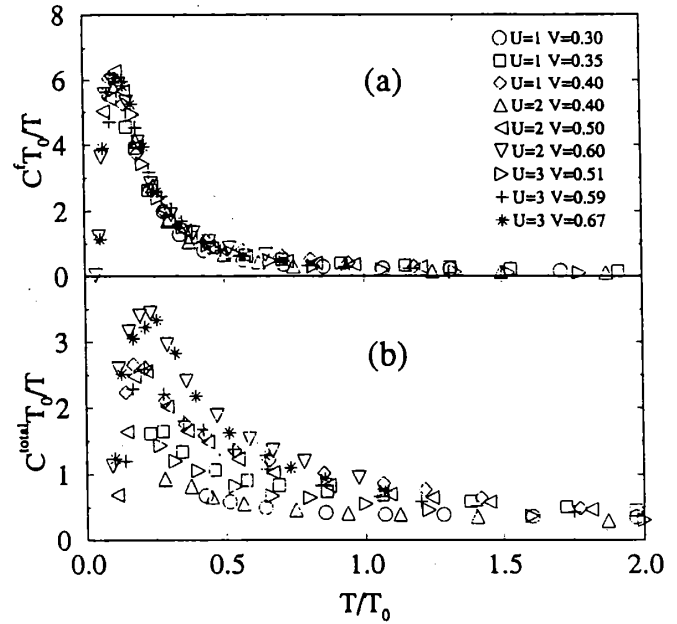


図 16: 電子-ホール対称無限次元周期アンダーソンモデルの比熱の  $\gamma$  係数 [32].

ギャップのエネルギースケールが相互作用の効果で著しく小さくなっていることが異なる点を強調したい。

それでは状態密度の低エネルギー部分の移り変わりが起こる温度スケールやギャップのエネルギースケールはどのような量で決まっているのであろうか？一不純物問題では低エネルギー領域の物理量は3章で示したように近藤温度でスケールされていた。Jarrell は無限次元モデルの近藤温度  $T_0$  を以下のように定義し計算結果の整理を行っている。無限次元の方法では、グリーン関数の自己無撞着解をひとつだけ見つけだすことができれば、問題は繰り込まれた有効媒質中の不純物問題と等価となっていた。その立場でローカルな帯磁率の有効媒質中の不純物（上記の定式化での0サイトという意味）による寄与の温度変化  $\chi_{imp}(T)$  を計算し、その絶対零度への外挿値の逆数を  $T_0$  の定義とした。図15が様々な  $U, V$  に対してそれぞれの  $T_0$  を単位とした  $\chi_{imp}(T)$  の振る舞いである。低温領域は  $T_0$  でスケールされていることがわかる。比熱の  $f$  電子からの寄与も同様に  $T_0$  でスケールされているが、全系の比熱はあまりスケールされていない（図16）。ここでの  $T_0$  と一不純物アンダーソンモデルの近藤温度  $T_0^{imp}$  を比較すると  $T_0$  の方が大きくなる。 $T_0^{imp}$  は (22) 式の  $\rho_c^{(0)}$  で与えられる繰り込まれていない媒質中の不純物問題の帯磁率から定義した近藤温度である。 $T_0^{imp}$  と  $T_0$  の比は Gutzwiller 近似から得られる、 $T_0^{imp}/T_0 \sim \exp(-1/2\rho_c^{(0)}(0)J_{fc})$ ,  $J_{fc} = 8|V|^2/U$  [34] と同程度となる。この比は図15のパラメータの場合で0.25～0.5程度である。

図17が様々な  $U, V$  に対してそれぞれの  $T_0$  を単位とした低温 ( $T = 0.05$ ) での励起スペクトルである。図(b) が  $f$  電子の状態密度である。ギャップの大きさをフェルミ準位から測ったピークの位置で定義するとどの場合も  $T_0/2$  程度となる。図(a) が  $f$  電子の局所的な動的スピン帯磁率から得られた局所的スピン相関関数であり、そのスピンギャップの大き



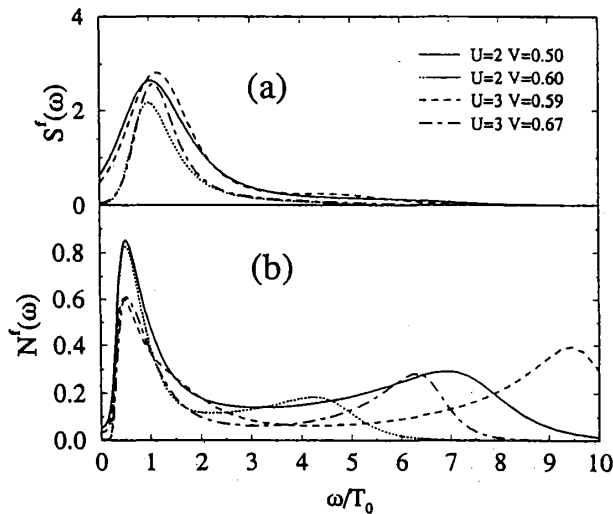


図 17: 電子-ホール対称無限次元周期アンダーソンモデルの局所的スピン相関関数 (a) と f 電子の状態密度 (b) [32].

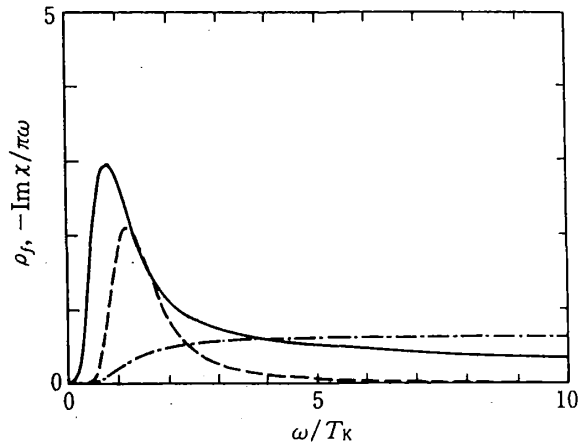


図 18: 電子-ホール対称無限次元周期アンダーソンモデルの励起スペクトル [33]. NRG 法による計算結果.

さは  $T_0$  程度で状態密度のギャップの 2 倍となる。この結果はバンド理論と定性的に一致している。さらに、静的なスピン帯磁率とチャージ帯磁率の低温の温度変化が同様に振る舞うことからチャージギャップはスピングャップと同じ程度になると結論づけている。

最近、同じモデルに対して NRG の方法を組み合わせた研究もなされている [33]。図 18 が絶対零度における f 電子の局所的な励起スペクトルの計算結果で、実線が f 電子の状態密度を表し、点線が磁気励起スペクトル  $T_K \chi_m'' / \omega$ 、一点鎖線が電荷励起スペクトル  $T_K \chi_c'' / \omega$  を  $10^3$  倍に拡大したものである。横軸の励起エネルギーは一不純物モデルでの近藤温度  $T_K$  を単位としてある。電荷励起スペクトルは磁気励起スペクトルに比べて強度は小さいが高エネルギー領域までテールをひいている。スピングャップとチャージギャップの大きさは同程度で、状態密度に現れるギャップの 2 倍程度となり Jarrell の結果と一致している。無限次元のモデルでスピングャップとチャージギャップが同程度になることは、一次元周期アンダーソンモデルでの結果と異なっている。一次元周期アンダーソンモデルではチャージギャップの方が大きくなる [35, 36]。2, 3 次元のモデルがどちらに近いかは未解決な問題である。

本稿中の NRG を用いた我々の研究結果は酒井先生（東北大理）との共同研究である。これらの研究を進めるに当たり、強相関系を研究している多数の方々に学会や研究会等を通して議論していただいた。ここにあらためて感謝いたします。また大貫先生（阪大理）、上田先生（東大物性研）には、原稿に目を通して修正加筆のコメントをいただき感謝いたします。

## 参考文献

- [1] N. Sato, A. Sumiyama, S. Kunii, H. Nagano and T. Kasuya, J. Phys. Soc. Jpn. **54**, 1923 (1985).
- [2] A. Sumiyama, Y. Oda, H. Nagano, Y. Ōnuki, K. Shibutani and T. Komatsubara, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 1294 (1986).
- [3] 近藤淳, 金属電子論, 裳華房 (1983).  
芳田奎, 近藤効果とは何か, 丸善 (1990).  
芳田奎, 磁性, 岩波書店 (1991).  
山田耕作, 岩波講座 現代の物理学 16 電子相関, (1993).
- [4] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [5] J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **149**, 491 (1966).
- [6] J. Kondo, Progr. Theor. Phys. **32**, 37 (1964).
- [7] K. Yosida and A. Yoshimori, in MAGNETISM V, H. Suhl, eds. (1973) p. 253.
- [8] K. Yosida and K. Yamada, Progr. Theor. Phys. **46**, 244 (1970); K. Yamada, *ibid.* **53**, 970 (1975); K. Yosida and K. Yamada, *ibid.* **53**, 1286 (1975); K. Yamada, *ibid.* **54**, 316 (1975).  
H. Shiba, Progr. Theor. Phys. **54**, 967 (1975).  
A. Yoshimori, Progr. Theor. Phys. **55**, 67 (1976).
- [9] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [10] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins and K. G. Wilson, Phys. Rev. B **21**, 1003 & 1044 (1980).
- [11] M. Koga and H. Shiba, preprint.
- [12] H. Kusunose, K. Miyake, Y. Shimizu and O. Sakai, preprint.
- [13] M. Tsvelick and P. B. Wiegmann, Adv. in Phys. **32**, 453 (1983).  
A. Okiji and N. Kawakami, in Theory of Heavy Fermions and Valence Fluctuations, T. Kasuya and T. Saso eds. (Springer-Verlag, 1985) p.46.; N. Kawakami and A. Okiji *ibid.* p. 57.  
P. Schlottmann, Phys. Rep. **181**, 1 (1989).
- [14] J. E. Hirsch and R. M. Fye, Phys. Rev. Lett. **56**, 2521 (1986).
- [15] H. Kojima, Y. Kuramoto and M. Tachiki, Z. Phys. B **54**, 293 (1984).  
P. Coleman, Phys. Rev. B **29**, 3035 (1984).  
N. E. Bickers, D. L. Cox and W. Wilkins, Phys. Rev. B **36** 2036 (1987).
- [16] O. Sakai, Y. Shimizu and T. Kasuya, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 3666 (1989).  
O. Sakai, Y. Shimizu and T. Kasuya, Progr. Theor. Phys. Suppl. **108**, 73 (1992).  
O. Sakai, S. Suzuki and Y. Shimizu, Physica B **206 & 207**, 141 (1995).  
Y. Shimizu and O. Sakai, Computational Physics as a New Frontire in Condensed Matter Research, H. Takayama *et al.* ed. (Phys. Soc. Jpn., 1995) in press.
- [17] J. E. Gubernatis, M. Jarrell R. N. Silver and D. S. Sivia, Phys. Rev. B **44**, 6011 (1991).

- [18] T. A. Costi, A. C. Hewson and V. Zlatić J. Phys. Condens. Matter **6**, 2519 (1994).
- [19] 鈴木俊哉, 東北大学修士論文 (平成6年) .
- [20] K. Hanzawa, K. Yamada and K. Yosida, J. Magn. Magn. Mater. **47 & 48**, 357 (1985).
- [21] H.-U. Desgranges and J. W. Rasul, Phys. Rev. B **36**, 328 (1987).
- [22] Y. Shimizu and O. Sakai, Physica B **186 & 188**, 891 (1993).
- [23] O. Gunnarsson and K. Schönhammer, in Theory of Heavy Fermions and Valence Fluctuations, T. Kasuya and T. Saso eds. (Springer-Verlag, 1985) p.100.
- [24] B. A. Jones and C. M. Varma, Phys. Rev. Lett. **58**, 843 (1987).  
B. A. Jones, C. M. Varma and J. W. Wilkins, Phys. Rev. Lett. **61**, 125 (1988).  
B. A. Jones and C. M. Varma, Phys. Rev. B **40**, 324 (1989).
- [25] O. Sakai, Y. Shimizu and T. Kasuya, Solid State Commun. **75**, 81 (1990).  
O. Sakai and Y. Shimizu, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 2333 & 2343 (1992).
- [26] W. Mezner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
- [27] E. Müller-Hartrmann, Z. Phys. B **74**, 507 (1989); **76**, 211 (1989).
- [28] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. Rozenberg, preprint (Rev. of Mod. Phys.),  
及びその中の参考文献.
- [29] F. J. Ohkawa, Prog. Theor. Phys. Suppl. **106**, 95 (1992).
- [30] V. Janiš, Z. Phys. B **83**, 227 (1991);  
V. Janiš and D. Vollhardt, Int. J. Mod. Phys. B **6**, 731 (1992).
- [31] A. Georges and G. Kotliar, Phys. Rev. B **45**, 6479 (1992).
- [32] M. Jarrell, Phys. Rev. B **51**, 7429 (1995)
- [33] O. Sakai: to be published.
- [34] T. M. Rice and K. Ueda, Phys. Rev. B **34**, 6420 (1986).
- [35] C. C. Yu and S. R. White, Phys. Rev. Lett. **71**, 3866 (1993).
- [36] T. Nishino and K. Ueda, Phys. Rev. B **47**, 12451 (1993).